

# アミノアセトニトリルのミリ波・サブミリ波分光

(東邦大院理<sup>a</sup>, 富山大院理<sup>b</sup>) ○元木勇太<sup>a</sup>・角田友香里<sup>a</sup>・尾関博之<sup>a</sup>・小林かおり<sup>b</sup>

## MILLIMETER AND SUBMILLIMETER-WAVE SPECTRUM OF AMINOACETONITRILE

(Toho Univ.<sup>a</sup>, Univ. Toyama<sup>b</sup>) Yuta Motoki<sup>a</sup>, Yukari Tsunoda<sup>a</sup>, Hiroyuki Ozeki<sup>a</sup>,  
Kaori Kobayashi<sup>b</sup>

Aminoacetonitrile ( $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CN}$ ) draws an attention with respect to a synthesis of amino acid, as it could be considered as a direct precursor of the simplest amino acid, glycine, in interstellar space. Recently Belloche et al. reanalyzed the previous millimeter-wave transitions of aminoacetonitrile<sup>1</sup>, and detected it toward SgrB2(N)<sup>2</sup>. We have measured pure rotational spectrum of aminoacetonitrile in the millimeter and the submillimeter-wave region. About 300 spectral lines including both a-type and b-type transitions were recorded from 122 GHz to 661 GHz, and centrifugal distortion constants up to the octic term were precisely determined. We had to reinvestigate most of the b-type transition lines due to wrong assignments in the previous study. The updated frequency catalogue of the aminoacetonitrile are now accurate enough for astronomically search up to 1 THz.

アミノアセトニトリル ( $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CN}$ ) は、加水分解により最も単純なアミノ酸であるグリシンを生成することから、星間空間におけるグリシンの前駆体として注目されている。この分子の純回転スペクトルは、リール大学のグループが主にミリ波領域において a-type 遷移 ( $J' \leq 40$ ) の測定を中心に行っており、マイクロ波領域での過去の測定結果とも併せて 10 次の遠心力項を含む分子定数を報告している<sup>1</sup>。それに基づき、Belloche らは、星間空間におけるアミノアセトニトリルの検出を目指すにあたり、このデータを精査した。その結果、過去に測定された b-type 遷移 15 本のうち 4 本について帰属に誤りがあり、それらを除外して再解析することにより、6 次の遠心力項までミリ波領域のスペクトル線周波数は十分説明できるとの結論を得た<sup>2</sup>。今回我々は、アミノアセトニトリルの純回転スペクトルを、ほぼ未測定である b-type 遷移を含め、サブミリ波領域まで拡張して測定を行った。

測定は東邦大学の光源周波数変調型サブミリ波分光計を用いて、122-661 GHz の周波数範囲で行った。a-type 遷移に関しては、回転量子数の増加と共に Belloche らによる予測周波数から最大でも 1-2 MHz 程度の系統的なずれが観測されたのみであった。しかし、b-type 遷移については  $K_a \geq 2$  の遷移を予想値付近に見出すことができなかった。そこで過去のデータを改めて検討した結果、除外すべき b-type 遷移がさらに数本あることが分かった。これにより high K の b-type 遷移まで帰属可能になった。本研究においては、 $J' \leq 73$ ,  $K_a \leq 15$  の a-type 遷移 107 本と、b-type 遷移 176 本を新たに測定し過去のデータと合わせて Watson の S-reduced Hamiltonian を用いて解析した。得られたアミノアセトニトリルの分子定数を Table 1 に示す。この値を用いることにより、1THz までのスペクトル線の周波数で天文観測を行う上で実用的な精度 (おおむね 100kHz 以下) で予想することが可能になった。

Table 1 Molecular constants of aminoacetonitrile

Parameter (MHz)	Present Study <sup>a</sup>	Bogey <i>et al.</i> <sup>b</sup>	Belloche <i>et al.</i> <sup>c</sup>
A	30246.48715 (90)	30246.755 (18)	30246.4561 (71)
B	4761.061966 (146)	4761.06169 (44)	4761.06102 (84)
C	4310.748772 (150)	4310.75076 (41)	4310.75123 (76)
$D_J \times 10^3$	3.066693 (136)	3.06545 (48)	3.06853 (68)
$D_{JK}$	-0.05529480 (85)	-0.055293 (10)	-0.0552986 (69)
$D_K$	0.7140098 (97)	1.0483 (20)	0.67662 (99)
$d_1 \times 10^3$	-0.6731843 (229)	-0.67160 (16)	-0.67160 (40)
$d_2 \times 10^3$	-0.0299408 (66)	-0.03096 (13)	-0.028893 (106)
$H_J \times 10^9$	9.451 (39)	9.47 (18)	9.593 (276)
$H_{JK} \times 10^6$	-0.123358 (172)	-3.067 (14)	-0.1201 (72)
$H_{KJ} \times 10^6$	-2.68354 (312)	6.85 (13)	-2.6861 (268)
$H_K \times 10^3$	0.052091 (36)	0.034479 (90)	0.030 <sup>d</sup>
$h_1 \times 10^9$	3.7152 (43)		2.989 (225)
$h_2 \times 10^9$	0.45735 (202)	-0.962 (93)	
$h_3 \times 10^9$	0.05303 (98)	2.623 (59)	
$L_J \times 10^{12}$	-0.0217 (34)		
$L_{JK} \times 10^9$		-3.58 (22)	
$L_{KJ} \times 10^{12}$		8.45 (98)	
$L_K \times 10^6$		17.08 (94)	
$S_K \times 10^9$		52.5 (33)	
rms	0.902		0.51

<sup>a</sup> standard deviation is 39.7kHz.

<sup>b</sup> Ref. 1, standard deviation is 27.2kHz.

<sup>c</sup> Ref. 2.

<sup>d</sup> fixed.

<sup>1</sup> M. Bogey, H. Dubus and J. C. Guillemin, *J. Mol. Spectrosc.*, **143**, 180 (1990).

<sup>2</sup> A. Belloche *et al.*, *A&A*, **482**, 179 (2008).